

メタン-空気噴流火炎における熱発生率に対する流れ場の動的効果*

横山 直人^{*1}, 水島 二郎^{*2}

Dynamical Effects of Flow Structures on Heat Release in Methane-Air Jet Flame

Naoto YOKOYAMA^{*1}, Jiro MIZUSHIMA^{*2}

^{*1} Energy Conversion Research Center, Doshisha University.

^{*2} Faculty of Engineering, Doshisha University.

Interactions between flows and chemical reactions in a jet diffusion flame are numerically investigated. A six-species and four-step kinetic mechanism is employed in the simulation of an axisymmetric methane-air flame without any kinematic approximations with respect to fluid flows. It is shown that the distributions of temperature and mass fractions of methane and oxygen agree quite well with Burke-Shumann solution from the macroscopic view. The layers of large heat release rates are located just outside of the classical flame surface defined by the stoichiometric mixture fraction. However, the layers are not uniform and the heat release rates vary in the layers with gradients of mixture fractions caused by velocity gradients. It is found by flame normal analyses that large heat release rates require oxygen flowing into the flame from the circumference owing to negative velocity gradients on the flame surface, for the heat release is largely provided by the oxidative reaction of hydrogen. Correspondingly, continuous burning requires discharge of the reaction products due to positive velocity gradients. Moreover, local elevation of pressure due to heat release qualitatively divides the flame field into fuel- and air-rich regions and also induces outgoing flow in the air-rich region. The lack of the influx which carries oxygen overtaking the outgoing flow due to pressure gradient causes local extinction or global quench.

Key Words : Diffusion Flame, Chemical Reactions, Flow Structures

1. はじめに

燃焼時に燃料と酸化剤が拡散・混合して混合気を形成する拡散火炎は、燃料と酸化剤を異なる経路で供給し安全であるため古代から広く使用されてきた。たとえば、ろうそくのような炭化水素系の燃料では拡散時にすすが生じ、人類はこのすすからの放射を光源や熱源として利用してきた。このように火炎の使用が非常に長期にわたるのにもかかわらず、現在に至っても燃焼の研究は実験および数値計算における挑戦的な課題である。

燃焼の数値的研究では、流体のもつ時間スケールと化学反応のもつ時間スケールの隔たりが大きいことに由来し、乱流場の瞬間的局所火炎構造は定常層流火炎によって模擬できるとする層流火炎片モデル⁽¹⁰⁾が、広く用いられてきた。しかしながら、反応面の厚さの増大⁽³⁾、カオス混合による化学反応の促進⁽⁹⁾など流れの性

質は、化学反応に多大な影響を及ぼすことが予想され、これらの性質を考慮した数値計算が必要とされる。実際、近年の計算機の能力の向上により、乱流予混合燃焼の直接数値計算が可能になると、Navier-Stokes 方程式および素反応からなる詳細化学反応機構により記述される予混合燃焼において、乱流微細渦が予混合火炎にもたらす影響が明らかになりつつある⁽⁸⁾。

本研究で対象とする噴流火炎では、平面 Rayleigh 散乱法によりメタン-空気乱流拡散火炎の瞬時 2 次元温度分布が測定され、高温領域の空気側への張り出し、火炎内への空気の巻き込み、高温領域における空気の存在などが可視化され、流体の渦構造の火炎における役割が述べられた⁽⁴⁾。また、非定常層流拡散火炎における渦構造と化学反応の相互作用は対流・拡散・化学反応の 3 段階の順次かつ重複する過程に分割して考えられることが示され、反応物質の流束が支配する局所消炎の機構も言及された⁽¹²⁾。

拡散火炎は、予混合火炎と異なり伝播速度をもたないために、流れ場、特に火炎面の伸長に対して敏感になる。したがって、従来の $k-\epsilon$ 法やラージエディシミュ

* 2005 年 7 月 28 日 2004 年度成果報告会, 原稿受付 2005 年 6 月 20 日

^{*1} 同志社大学エネルギー変換研究センター (〒 610-0394 京田辺市多々羅都谷 1-3)

^{*2} 同志社大学工学部 (〒 610-0394 京田辺市多々羅都谷 1-3)
Email: nyokoyam@mail.doshisha.ac.jp

レーション (LES) によって流れ場を記述する場合や以前の空間解像度が低い数値計算では、化学反応の持つ長さスケールを計算することができないために火炎面を十分に捉えることができない。本研究では、メタン-空気噴流火炎において6種4段階簡略反応機構に基づき、流れ場に対して近似を用いない数値計算を行い、流れ場と化学反応の相互作用を調べ、熱発生に対する火炎面近傍の動力学の影響を述べる。

2. 数値計算法

燃焼場の支配方程式は、質量、運動量、エネルギー、化学種の保存方程式を用いて表される。本研究では、運動方程式において外力と体積粘性を無視し、エネルギー方程式において運動エネルギー、圧力仕事、外力、Dufour効果、輻射、粘性散逸を無視する。さらに、化学種方程式において圧力拡散、Soret効果を無視すると、密度 ρ 、速度 \mathbf{u} 、温度 T 、化学種 i の質量分率 Y_i に対する支配方程式は以下ようになる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1a)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (1b)$$

$$\frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) - \frac{1}{c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = -\frac{1}{c_p} \sum_i h_i \omega_i, \quad (1c)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) - \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) = \omega_i. \quad (1d)$$

ここで、圧力 p は、気体定数 R と化学種 i の分子量 W_i を用いて状態方程式により $p = \rho R T \sum_i Y_i / W_i$ と表せ、粘性応力テンソル $\boldsymbol{\tau}$ は μ を粘性係数、 \mathbf{I} を単位テンソルとして $\boldsymbol{\tau} = \mu (T) (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - 2/3 (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I})$ である。平均定圧比熱 \bar{c}_p は、 $\bar{c}_p = \sum_i Y_i c_{p,i}$ と与えられる。化学種 i の定圧比熱 $c_{p,i}$ とエンタルピー h_i の温度依存性は多項式によって与えられ、その係数には CHEMKIN⁽⁶⁾ を用いた。また、 ω_i は化学反応による化学種 i の生成項である。熱伝導係数 λ 、 i 種の拡散係数 D_i 、粘性係数 μ は、簡略輸送モデル⁽¹¹⁾を用い、それぞれ、 $\lambda / \bar{c}_p = A (T / T_0)^{0.7}$ 、 $\rho D_i = Le_i^{-1} (\lambda / \bar{c}_p)$ 、 $\mu = Pr (\lambda / \bar{c}_p)$ により与える。ここで、比例係数を $A = 2.58 \times 10^{-5} \text{kg}/(\text{m} \cdot \text{sec})$ 、基準温度を $T_0 = 298.15 \text{K}$ 、Prandtl 数を $Pr = 0.75$ とした。ここで、 Le_i は i 種の Lewis 数である。

化学反応には6種4段階簡略反応機構⁽⁵⁾、

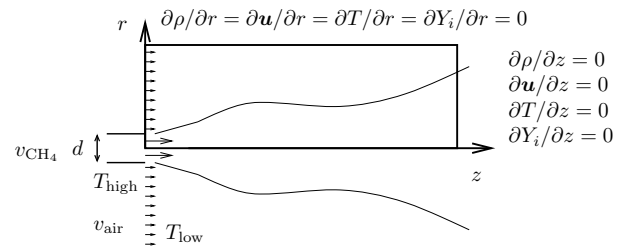
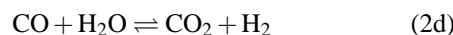
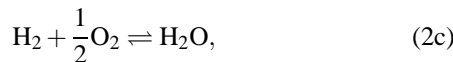
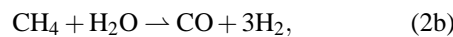
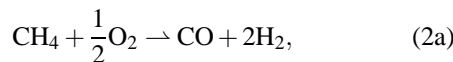


Fig. 1 計算領域および境界条件.

を用いた。

本研究では、軸対称性を仮定し、図1中の矩形領域のみを計算対象とする。空間微分には、動径方向および軸方向ともに格子間隔を $2 \times 10^{-5} \text{m}$ とした6次コンパクト差分法⁽⁷⁾を用い、流入条件は、図1に示すように、直径 $d = 3 \times 10^{-3} \text{m}$ のノズルから温度 $T_{\text{low}} = 300 \text{K}$ 、質量分率 $Y_{\text{CH}_4,0} = 1$ の純メタンが、軸方向速度 $v_{\text{CH}_4} = 30 \text{m/sec}$ で流入し、その周囲から温度 T_{low} 、 $Y_{\text{O}_2,0} = 0.232$ 、 $Y_{\text{N}_2,0} = 0.768$ で混合された空気が軸方向速度 $v_{\text{air}} = 3 \text{m/sec}$ で流入するとした。さらに、流入境界直後での吹き飛びを防ぐために、ノズルは高温 $T_{\text{high}} = 2000 \text{K}$ であるとした。ただし、 $t < 5.0 \times 10^{-4} \text{sec}$ の初期段階では着火を引き起こすためにノズル温度は $T_{\text{high,init}} = 2500 \text{K}$ とし、 $t > 1.0 \times 10^{-3} \text{sec}$ で T_{high} となるように $5.0 \times 10^{-4} \text{sec} \leq t < 1.0 \times 10^{-3} \text{sec}$ で連続的に下げた。流出境界では、物理量の境界法線方向微分を0とした。この系の特徴的な無次元数は、Reynolds 数 $Re \sim 9 \times 10^3$ および流れと化学反応の時間スケールの比である Damköhler 数 $Da \sim 3 \times 10^7$ である。また、時間積分には4次 Runge-Kutta 法を用いた。

3. 数値計算結果

3.1 燃焼場の特性 本研究では、メタン-空気噴流拡散火炎の数値計算を行った。時刻 $t = 1.7 \times 10^{-2} \text{sec}$ における燃焼場を図2に示す。計算領域は噴流の流下にしながら拡大し、時刻 $t = 1.7 \times 10^{-2} \text{sec}$ での計算領域は、動径方向に $0 \text{m} \leq r \leq 1.8 \times 10^{-2} \text{m}$ 、対称軸方向に $0 \text{m} \leq z \leq 1.2 \times 10^{-1} \text{m}$ の広さを持つ。本稿では、この時刻において、初期条件および境界条件の影響を受けない $2 \times 10^{-2} \text{m} \lesssim z \lesssim 9 \times 10^{-2} \text{m}$ の領域での火炎の挙動を調べる。温度、二酸化炭素および水の質量分率を、それぞれ、図2(a),2(b),2(c)に示す。噴流火炎が流下するにしながら、流入境界で主としてメタンに与えられた運動量が動径方向に拡散するとともに反応により生成された温度は移流によって拡大される。式(2c)の反応で生成される二酸化炭素が高温領域に広く存在するのに対し、式(2b)の反応で生成される水は、主と

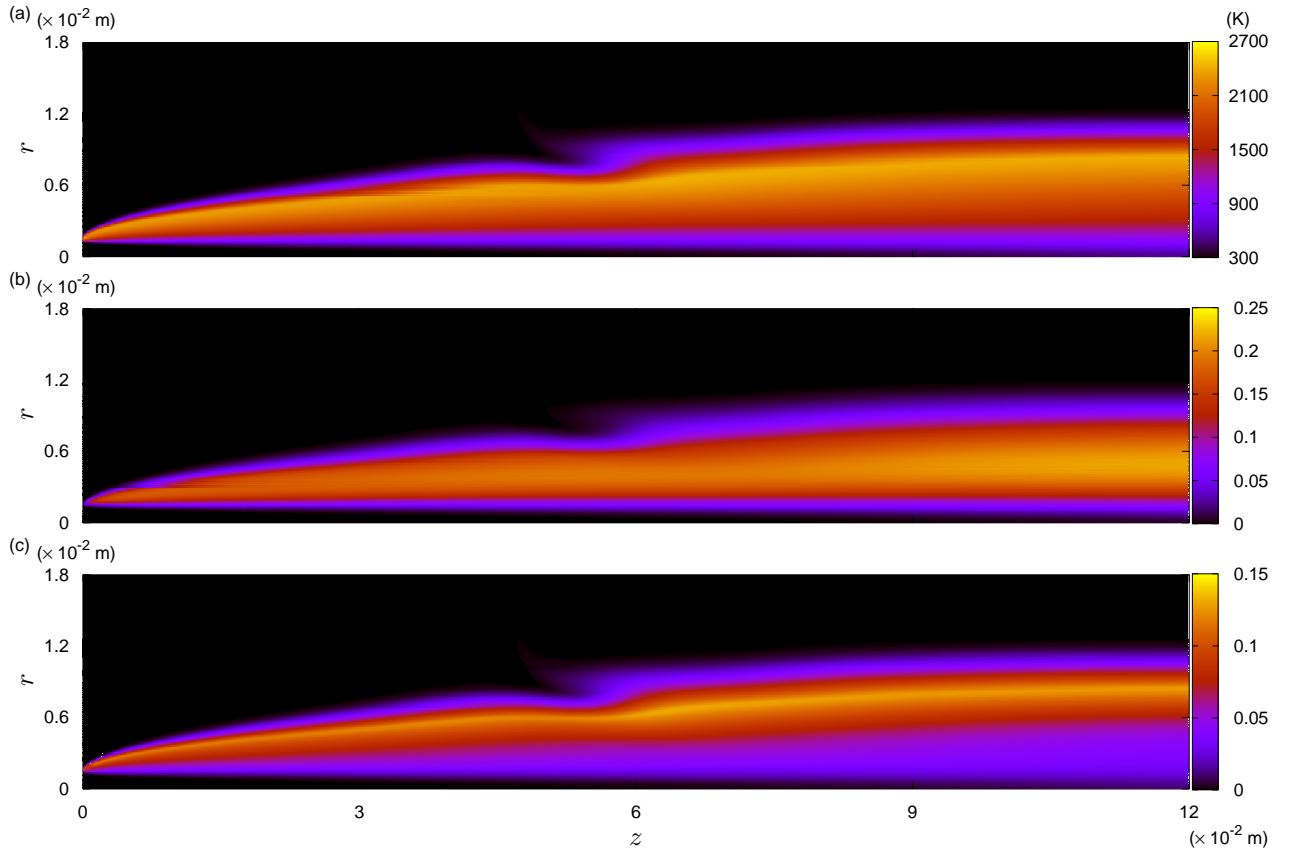


Fig. 2 $t = 1.7 \times 10^{-2}$ secにおける燃焼場. (a) 温度場, (b) 二酸化炭素, (c) 水の各質量分率場. 縦軸 r は動径方向座標, 横軸 z は対称軸方向座標である.

して高温領域の外縁部に存在する. このことは, 二酸化炭素の Lewis 数が水の Lewis 数よりも大きいという特性に反し, 高温領域外縁部で式 (2c) の反応が選択的に生じていることを表している.

火炎片モデルでは混合分率⁽¹⁾

$$Z = \frac{\frac{2Y_{\text{CH}_4}}{W_{\text{CH}_4}} + \frac{Y_{\text{O}_2,0} - Y_{\text{O}_2}}{W_{\text{O}_2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{Y_{\text{CO}}}{W_{\text{CO}}} + \frac{Y_{\text{H}_2}}{W_{\text{H}_2}} \right)}{\frac{2Y_{\text{CH}_4,0}}{W_{\text{CH}_4}} + \frac{Y_{\text{O}_2,0}}{W_{\text{O}_2}}} \quad (3)$$

を用いて流れと化学反応の相互作用が記述される. 混合分率は純酸化剤領域で 0, 純燃料領域で 1 の値をとるラグランジアン保存量¹である. また, 化学量論比, すなわち本研究ではメタン 1mol に対して酸素 2mol のモル濃度比によって古典的な火炎面は,

$$Z = \frac{Y_{\text{O}_2,0}/W_{\text{O}_2}}{2Y_{\text{CH}_4,0}/W_{\text{CH}_4} + Y_{\text{O}_2,0}/W_{\text{O}_2}} = Z_{\text{st}} \quad (4)$$

で定義され, 本研究では $Z_{\text{st}} \approx 0.055$ である. 実際, 図 3 に示すように, 本研究で得られた熱発生率 $Q = -\sum_i h_i \omega_i$ の大きな領域は, この化学量論的混合分率 Z_{st} によって定義される火炎面とよく一致している.

¹実際には D_i が全て等しいと仮定し, 式 (5) を認めてはじめて保存する.

全ての化学種の Lewis 数が等しく, したがって拡散係数 D_i が同一の D であるならば, 混合分率の時間発展は

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla Z = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \quad (5)$$

と表される. 火炎片モデルでは, 各化学種の質量分率および温度の時間発展を直接解くことは行わない. まず式 (5) により全空間で混合分率を求め火炎面 $Z = Z_{\text{st}}$ を決定する. 次に (5) 式によって得られた火炎面の近傍でのみ火炎片方程式,

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{Le_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \omega_i, \quad (6a)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \omega_T \quad (6b)$$

によって各化学種の質量分率および温度の時間発展を与える. ここで, スカラー散逸率 χ は $\chi = 2D|\nabla Z|^2$ であり, ω_T は化学反応による温度生成項である. このようにして火炎片モデルは, 火炎の持つ反応拡散構造を記述するのである.

化学反応を反応速度無限大の総括一段階不可逆反応とし, すべての Lewis 数を 1 とすると, 燃焼域では温

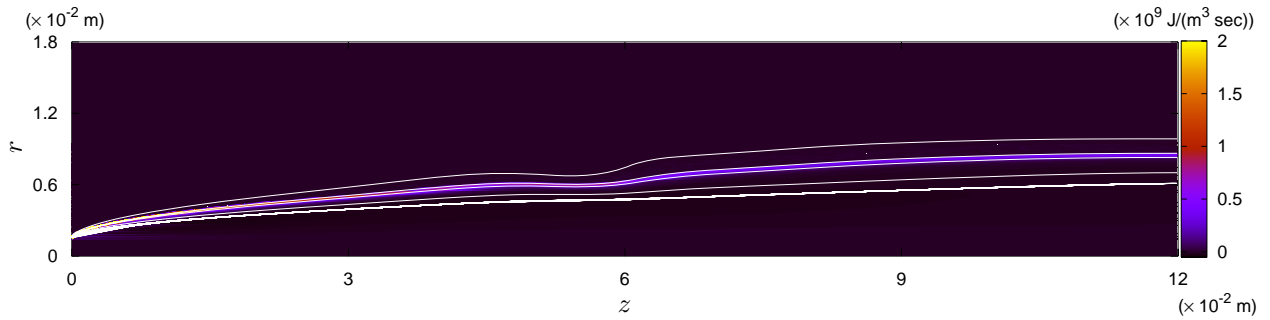


Fig. 3 熱発生率および混合分率 (白線, 空気領域からメタン領域に向かって $Z = 0.025, 0.05, 0.055, 0.075, 0.01.$)

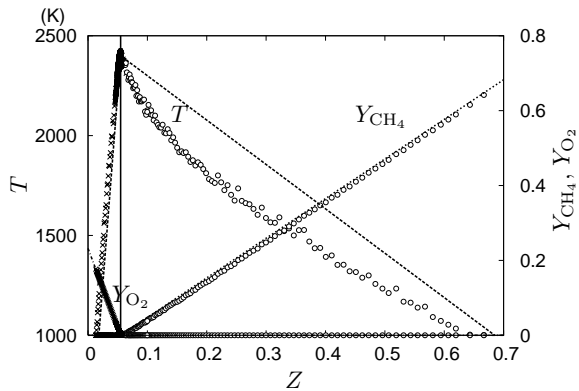


Fig. 4 温度 T , メタン質量分率 Y_{CH_4} および酸素質量分率 Y_{O_2} の散布図. 横軸は混合分率 Z . 黒丸, バツ, 白丸の記号はそれぞれ $Q > 10^8 \text{ J/(m sec)}$, $0 \text{ J/(m sec)} < Q < 10^8 \text{ J/(m sec)}$, $Q < 0 \text{ J/(m sec)}$ の領域での温度, メタン, 酸素の分布を表す. また, 破線, 点線, 一点鎖線は, それぞれ, 温度, メタン質量分率, 酸素質量分率の Burke–Schumann 解を表す. 実線は, 火炎面 $Z = Z_{st}$ を表す.

度および質量分率を混合分率の関数として火炎片方程式 (6) の解のひとつである Burke–Schumann 解⁽²⁾ が得られる. 本研究での温度および質量分率の分布を図 4 に示す. $Z > Z_{st}$ の領域での温度分布は反応式 (2b) の吸熱反応による温度低下があるものの, メタンおよび酸素の質量分率分布は Burke–Schumann 解とよく一致する.

3.2 火炎面近傍における流れの影響 図 5 は, $Z = Z_{st}$ で定義された火炎面上の自然座標 ξ の関数として (a) 熱発生率とスカラー散逸率および (b) 火炎法線歪み速度と火炎面内歪み速度および温度を示したものである. ここで $\xi = 0$ は火炎面と r 軸との交点に対応する. また, 火炎面の法線ベクトルを \mathbf{n} として火炎法線歪み速度 φ_n および火炎面内歪み速度 φ_t は, それぞれ,

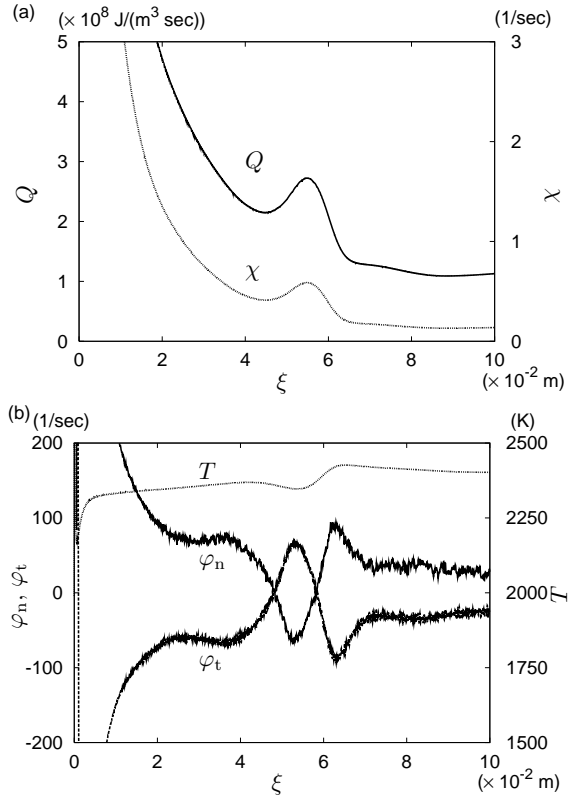


Fig. 5 混合分率によって定義された火炎面 $Z = Z_{st}$ 上での (a) 熱発生率 (実線), スカラー散逸率 (破線) および (b) 火炎法線歪み速度, 火炎面内歪み速度 (実線), 温度 (破線).

$\varphi_n = \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, $\varphi_t = \nabla \cdot \mathbf{u} - \varphi_n$ と定義される. このとき, 図 3 で $5 \times 10^{-2} \lesssim z \lesssim 6 \times 10^{-2}$ 領域に存在する高熱発生率の層は, 図 5(a) において $5 \times 10^{-2} \lesssim \xi \lesssim 6 \times 10^{-2}$ の高熱発生率域に対応する. 火炎片方程式 (6) に基づく多くの確率モデル⁽¹⁰⁾がスカラー散逸率を火炎を特徴づける確率変数としているように, 図 5(a) は高熱発生率はスカラー散逸率に依存していることを示している. また, 火炎面上で温度変化が大きいことよりこの高スカラー散逸率は拡散係数の温度依存性ではな

く、図 5(b) が示すように負の火炎法線歪み速度の蓄積によってもたらされる混合分率の大きな勾配によるものであることがわかる。

図 5 に見られる火炎面上での熱発生率の不均一性を調べるために、図 6(e) に示す火炎面上 5 点で火炎面に垂直な座標系をとり、この座標系上での熱発生率、式 (2c) で与えられる水素と酸素の反応速度、混合分率および酸素の質量分率を図 6(a-d) に示す。図 6(a), 6(b) より、熱発生層は、その大部分が反応式 (2c) の水素と酸素による水の生成反応によって生じていることがわかる。これは、2000K を超える高温領域では、他の化学種と比較して水素の持つエンタルピーが非常に大きく、また水のエンタルピーが非常に小さいために式 (2c) の反応が熱発生率に大きく寄与するからである。また、図 5 と同様に、点 C 近傍における高熱発生率は図 6(c) に示された混合分率の勾配の大きさによってもたらされるが、とくに、図 6(d) が示すように、混合分率の勾配は火炎周囲に存在する酸素の質量分率の勾配に起因することを示している。すなわち、火炎面に流入する酸素が火炎面の熱発生に強い影響を与えるのである。実際、図 5 に示したように火炎面上の速度歪みのみならず、火炎面に流入する酸素は、高熱発生率層の外側の速度歪みに強く依存することがわかる。すなわち、流れ場の移流によってもたらされる混合分率、とりわけ酸素の質量分率の空間構造は、火炎の熱発生率に大きな影響を与え、化学反応は流れ場の構造に強く依存すると言える。また、図 7 に示される圧力場では、多くの弧が見られる。これらは、熱発生によって火炎面近傍で局所的に圧力が上昇し、熱発生領域から音波が放出されていることを表す。このようにして、熱発生領域が擬似的な障壁となり火炎面をまたがる流れが抑制される。この流れの分断は、流れ場に対する化学反応からのフィードバックと言える。

4. ま と め

本研究では、メタン-空気の噴流拡散燃焼において、熱発生率の大きな面が化学量論的混合分率によって定義される火炎面とよい一致を示すことを 6 種 4 段階簡略化学反応機構による流体運動に関して近似を用いない数値計算により確認した。また、熱発生層の大部分は水素と酸素の反応によるものであり、この反応は火炎の外側から流入する酸素によって支配される。この点において、流れ場の構造は化学反応に大きな影響を与え、また、熱発生による圧力の局所的な増加により、流れ場は火炎面の両側で分断される。これは、流れ場に対する化学反応からのフィードバックと言える。

謝 辞

本研究の数値計算は京都大学基礎物理学研究所ならびに東北大学情報シナジーセンターの計算設備にて行った。

文 献

- (1) R. W. Bilger. In *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, pp. 475–488. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988.
- (2) S. P. Burke and T. E. W. Schumann. In *First Symposium (International) on Combustion*, pp. 2–11. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1928.
- (3) J. M. Donbar, J. F. Driscoll, and C. D. Carter. *Combust. Flame*, 125:1239–1257, 2001.
- (4) D. A. Everest, J. F. Driscoll, W. J. A. Dahm, and D. A. Feikema. *Combust. Flame*, 101:58–68, 1995.
- (5) W. P. Jones and R. P. Lindstedt. *Combust. Flame*, 73:233–249, 1988.
- (6) R. J. Kee, F. M. Rupley, E. Meeks, and J. A. Miller. Technical Report SAND96-8216, Sandia National Laboratories, 1996.
- (7) S. K. Lele. *J. Comput. Phys.*, 103:16–42, 1992.
- (8) Y. Nada, M. Tanahashi, and T. Miyauchi. *J. Turbulence*, 5:16, 2004.
- (9) O. Paireau and T. Tabeling. *Phys. Rev. E*, 56(2):2287–2290, 1997.
- (10) N. Peters. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10:319–339, 1984.
- (11) M. D. Smooke, J. Wess, D. Ruelle, R. L. Jaffe, and J. Ehlers eds. Springer-Verlag, 1991.
- (12) F. Takahashi and V. R. Katta. *Proc. Combust. Inst.*, 26:1151–1160, 1996.

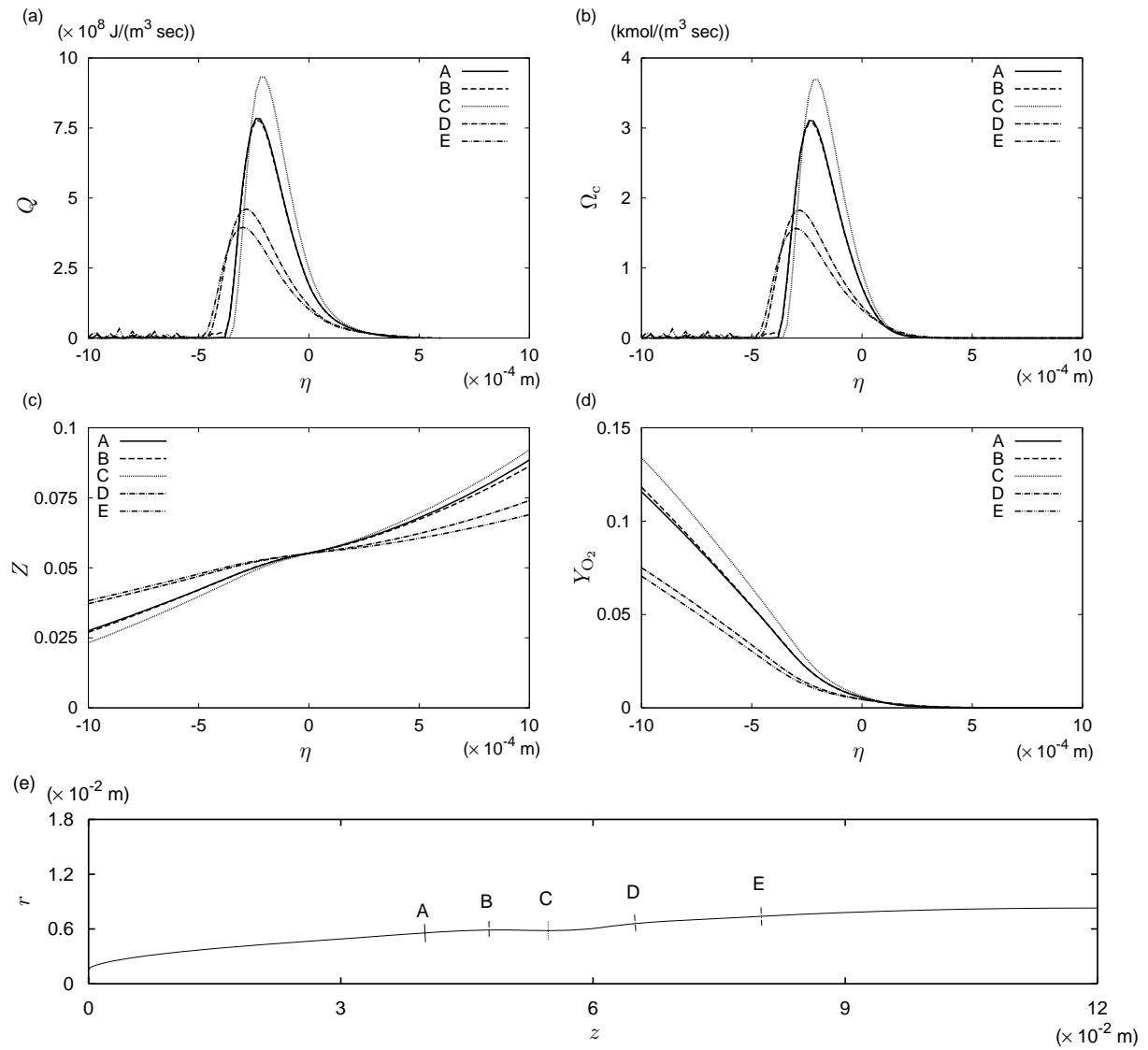


Fig. 6 火炎面に垂直な自然座標系での (a) 熱発生率, (b) 式 (2c) で与えられる水素と酸素の反応速度, (c) 混合分率, (d) 酸素の質量分率および (e) (a)-(d) を描くための火炎面に垂直な座標系. η は空気領域からメタン領域に向かう方向を正とした.

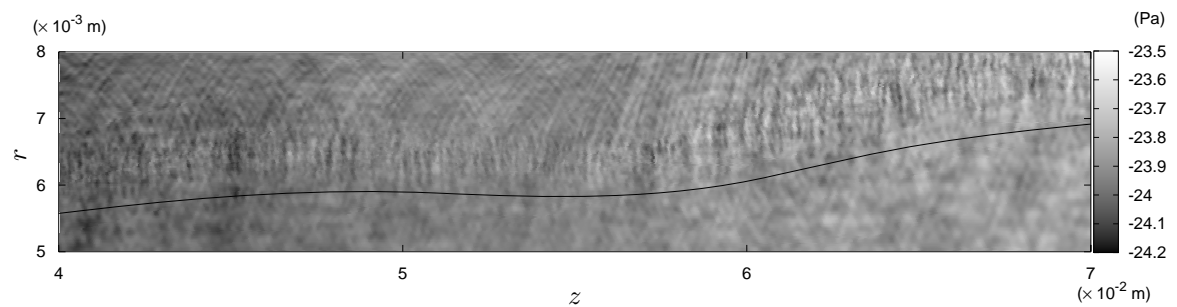


Fig. 7 高熱発生率層近傍の圧力場. 大気圧を 0Pa に正規化してある. 実線は化学量論的混合分率によって定義される火炎面である.